一次元フィボナッチ準結晶の電子状態 : 繰り込み群による解析(クエイサイクリスタルの構造と物性,科研費研究会報告)

阿部, 研; 堂寺, 知成

一次元フィボナッチ準結晶の電子状態〜繰り込み群による解析

東大教養・基礎科学科第一・阿部研　堂寺知成

§１．紹介

近年クローズアップされている準結晶の概念はさまざまである。その中でも理想的な準結晶として一次元フィボナッチ格子がある。フィボナッチ数列（$F_{n+1}=F_n+F_{n-1}$、$F_1=1$，$F_2=2$）に関係するフィボナッチのＡＢ列{A,B,A,A,B,A,B,A…}は、Ａから始めてＡ→ＡＢ、Ｂ→Ａの変換で作られる。この変換と逆変換に対し自己相似であるのがこの列の顕著な特徴で、結晶でないのはＡとＢの比（F_{n-1}/F_{n-2}）が黄金比に収束することからわかる。

本稿で扱う電子のタイト・バインディング模型は、{t_n：ホッピング・マトリックス}={A,B,A,A,B,…}：$t_{n-1}\phi_{n-1}+t_{n+1}\phi_{n+1}=E\phi_n$である。数値計算によるとエネルギースペクトルはカントール集合的であること、各バンドの状態数が $F_{m-1}:F_m:F_{m-1}$ の比で次々に三分割されること、などが知られている。この三分割に対して次の直感的説明がある。Ａ＝０、Ｂ＞０と仮定すると、格子はＢを挟む二原子分子とＡＡに挟まれた一原子に分解される。よって三つのレベルができる。ＡＢ列からＢを選ぶと二回粗視化した間隔の広いＡＢ列ができる。同様にＡＡを選ぶと三回粗視化したＡＢ列ができる。そこでさらに大きな二原子分子と一原子ができるとすれば、それぞれのレベルの三分割が繰り返される。

本研究の目的は、スペクトルが次々に三分割され、カントール集合になることを実空間繰り込み群の手法で厳密に正当化することである。

§２．自己相似を利用した繰り込み群変換

自己相似変換に従う粗視化（ＡＢ→Ａ、Ａ→Ｂ）を行なう。繰り込み群方程式は、

$A(n+1)=A(n)B(n)$　：　$B(n+1)=A(n)E_b(n)$

$E_a(n+1)=E_b(n)E_{ab}(n)-\{A(n)\}^2$　：　$E_b(n+1)=E_a(n)E_b(n)-\{B(n)\}^2$

$E_{ab}(n+1)=E_a(n)E_b(n)-\{A(n)\}^2-\{B(n)\}^2$

初期値：$A(1)=A$，$B(1)=B$，$E_a(1)=E_b(1)=E_{ab}(1)=E$　(2.1)

となる。さらに、相互作用定数の比、$r(n)=A(n)/B(n)$、および

$\varepsilon_a(n)=E_a(n)/A(n)$，$\varepsilon_b(n)=E_b(n)/B(n)$，$\varepsilon_{ab}(n)=E_{ab}(n)/A(n)$

で置き換えれば、

$\varepsilon_a(n+1)=\varepsilon_b(n)\varepsilon_{ab}(n)-r(n)$　：　$\varepsilon_b(n+1)=\varepsilon_a(n)-1/(r(n)\varepsilon_b(n))$

$\varepsilon_{ab}(n+1)=\varepsilon_a(n)\varepsilon_b(n)-r(n)-1/r(n)$　：　$r(n+1)=1/\varepsilon_b(n)$

初期値：$\varepsilon_a(1)=\varepsilon_{ab}(n)=E/A$，$\varepsilon_b(n)=E/B$，$r(n)=A/B$　(2.2)

を得る。$\varepsilon_a(n)$、$\varepsilon_{ab}(n)$、$r(n)$は$\varepsilon_b(n)$で表現できるので、$\varepsilon_b(n)$の関係式

$\varepsilon_b(n+3)=\varepsilon_b(n)\varepsilon_b^2(n+1)-\varepsilon_b(n+1)/\varepsilon_b(n-1)-\varepsilon_b(n+1)/\varepsilon_b(n+2)-\varepsilon_b(n)$　(2.3)

にすべての情報が含まれている。これから導かれる漸化式

$\varepsilon_{ab}(n+1)=\varepsilon_{ab}(n)\varepsilon_{ab}(n-1)-\varepsilon_{ab}(n-2)$　(2.4)

について以下考察する。

§３．美しい数学表現？

$\varepsilon_{ab}(n)$は伝送行列法の跡(tr)に相当する．$n\to\infty$で跡が発散するような初期値Ｅは固有値として許されない．(2.4)では連続して２以上になるのが目安である．A=1, B=3のときの$\varepsilon_{ab}(n)$: n=1〜7をＥに関し示したのが図１である．自己相似に三分割されてギャップができる様子がわかる．さらに注目したいのは各$\varepsilon_{ab}(n)$はF_n次の関数でF_n個の零点を持つことである．ただし、$F_1=1$，$F_2=2$，$F_{n+1}=F_n+F_{n-1}$(Fibonacci数列)である．

$x=E/A$，$r=A/B$とすると問題は次のようになる．

問題　初期関数：$F_1(x)=x$　：　$F_2(x)=r(x^2-1-1/r^2)$，

$$F_3(x)=rx(x^2-2-1/r^2). \tag{3.1}$$

漸化式　：

$$F_{n+1}(x)=F_n(x)F_{n-1}(x)-F_{n-2}(x) \tag{3.2}$$

について調べよ．ただし、$R=r+1/r>2$、として次の不変量が存在する．

$$F_{n+1}^2(x)+F_n^2(x)+F_{n-1}^2(x)-F_{n+1}(x)F_n(x)F_{n-1}(x)=R^2 \tag{3.3}$$

以降$F_n(x)$をフィボナッチの多項式と呼ぶこととする．

答案の一部として$r=1$（$A=B$）、つまり結晶の場合を見ておこう．$F_n\to 2T_{Fn}$、$x\to 2y$と変換することにより容易にチェビシェフの多項式、

$$T_1(y)=y,\ T_2(y)=2y^2-1,\ T_{n+1}(y)=2yT_n-T_{n-1}, \tag{3.4}$$

を確かめることができる．チェビシェフの多項式の性質により、$|x|\leqq 2$のとき、すべてのnに対し$|2T_n|\leqq 2$なのでギャップは生じないことがわかる．対照的に$r\neq 1$では$|F_2(x)|$、$|F_3(x)|$の極値は>2である．

§４．フィボナッチの多項式の解の構造

(3.2)から次のようなことがわかっている．

(1)（三分割の仕組）$F_n(x)$、$F_{n-1}(x)$に十分近い零点があるとき、$F_{n+1}(x)$の零点はそれらを挟むように生じる．

(2)（近接する零点）$F_{n+2}(x)$の零点は$F_n(x)$、$F_{n-1}(x)$の零点の内側にひとつ、両側の$F_{n+1}(x)$の零点の十分近くにふたつ、計３つ生じる．

(3)（近接する零点の収束）$F_n(x)$、$F_{n-1}(x)$に十分近い零点があるとき、３サイクル進んだ$F_{n+3}(x)$、$F_{n+4}(x)$の零点は内側に入る．極限をとれば一点x_3に収束する．その時

$$(F_{n+m}(x_3): m=1,\cdots,5,\cdots,:\text{六周期})=(0,0,-R,0,0,R),\ R=r+1/r>2. \tag{4.1}$$

以上のことを模式的に示したのが図2.1〜2.3である．１が零点を示す．

これをもとにすると十分小さな$r<1$に対して図３のような解の構造ができる．フィボナッチ数で三分割される様子と個数がF_nで増える様子が明らかである．自己相似になっていることに注目したい．これをフィボナッチの木と呼ぼう．原子数＝F_nであることを考えると各状態はフィボナッチの木の末端と一対一対応する．(1,1,1)が現われて次に(1,1,1)が現れるのは、端は二回、中心は三回粗視化すれば良いこともただちにに判る．これは紹介で示した直感的説明に一致する．

一般的相似性に言及しよう．空間$\Sigma=\{\mathbf{s}=(s_1,s_2,s_3,\cdots)\mid s_j=-1,0,1\}$の元$\mathbf{s}$で各状態を指定する．粗視化する写像$\sigma:\Sigma\to\Sigma$、$\sigma(s_1,s_2,s_3,\cdots)=(s_2,s_3,s_4,\cdots)$を定義すれば、$\sigma^n\mathbf{s}'=\mathbf{s}$ (n=1,2,…)の時、$\mathbf{s}'$は$\mathbf{s}$に粗視化の意味で相似になっている．$\mathbf{s}'=\mathbf{s}$のと

き自己相似である。

さて、n→∞でスペクトルがカントール集合であることを示そう。六周期点をなす集合{x₃}のほかに極限点x（例、二周期点）も発散しない。これらのなす集合{x, x₃}は空間Σと一対一対応する。閉集合で、区間を含まず（完全不連結）、全ての点はそのいかなる近傍にも無限に多くの集合に属する点を持つ（完全）のであるから、カントール集合になっている。この測度０の集合以外は発散する。

十分大きなr＞１では、図2.4のように初めだけ五分割で始まる以外は同じである。つまり、局所的構造の差はスペクトルの概形に影響するだけで、自己相似性を壊さない限りに於いてカントール集合的性質はかわらない。式(3.2)がカントール集合的性質を作り、この生成過程は結合定数及び関数そのものの微小変化に対して安定であると考えられる。

§５．まとめ

フィボナッチの多項式の存在が明らかになった。これが一次元フィボナッチ準結晶のエネルギースペクトルの性質（フィボナッチ数による自己相似三分割、カントール集合）を定めているのである。

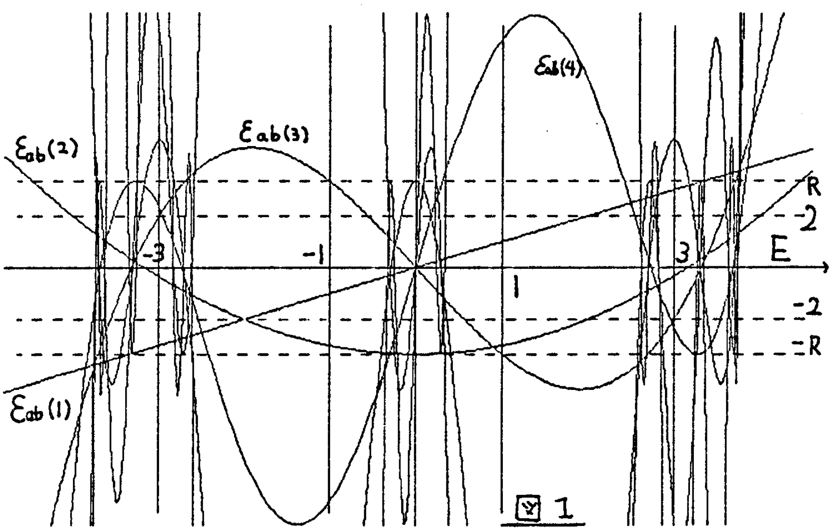

図1

F_{n+1}	1 0 1
F_n	1
F_{n-1}	1
F_{n-2}	0

図2.1

F_{n+2}	1 1 1
F_{n+1}	1 0 1
F_n	1
F_{n-1}	1

図2.2

F_{n+3}	1
F_{n+2}	1
F_{n+1}	0
F_n	1
F_{n-1}	1

図2.3

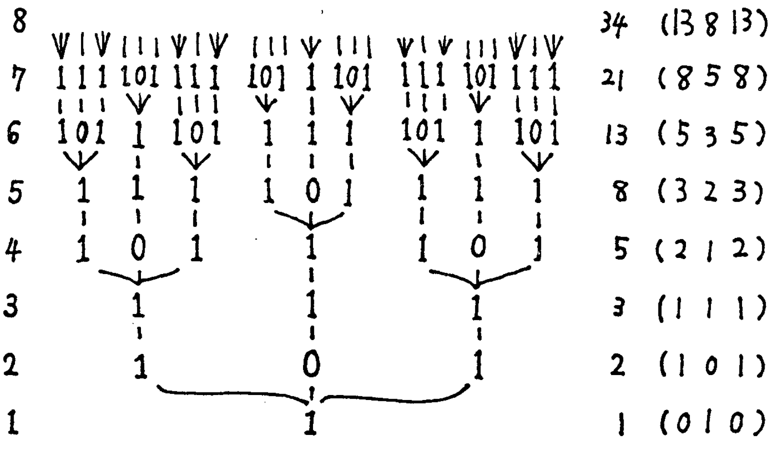

図3 フィボナッチの木

5	101 1 101 1 101
4	1 1 1 1 1
3	1 0 1 0 1
2	1 0 1
1	1

図2.4 (r>1)